



TITLE:

11.Car-Parrinelloの方法による結晶シリコンの構造及び電子的特性の研究(慶応義塾大学大学院理工学研究科物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1990年度))

AUTHOR(S):

打越, 晋

CITATION:

打越, 晋. 11.Car-Parrinelloの方法による結晶シリコンの構造及び電子的特性の研究(慶応義塾大学大学院理工学研究科物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1990年度)). 物性研究 1991, 56(6): 760-760

ISSUE DATE:

1991-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94611>

RIGHT:

11. Car-Parrinello の方法による結晶シリコンの構造及び 電子的特性の研究

打 越 晋

凝縮系の安定構造決定問題において最も効率的な方法の一つとして、1985年に R. Car と M. Parrinello が発表した第一原理分子動力学法、いわゆる “Car-Parrinello の方法” が挙げられる。この方法は、特に Si 等の共有結合性物質に対して有効であり、また、次のような特徴を持っている。すなわち、非経験的な原子間ポテンシャルを求める際に必要な電子構造を、従来の方法のように密度汎関数法を用いてセルフコンシステントに計算するのではなく、仮想的な運動方程式を導入し、それを解くことにより求めるという点である。密度汎関数法では、行列を繰り返し対角化するという作業が不可欠であり、このために多大な計算労力が必要であったが、Car-Parrinello の方法では行列を対角化しないばかりでなく、電子構造を原子の運動と同時に計算することも可能にした。

そこで本論文では、まず、次の三つのことがらについて簡単に説明する。

- (a) ノルム保存擬ポテンシャル。
- (b) 密度汎関数法及び局所密度近似。
- (c) Car-Parrinello の方法の基本原理。

次に、実際にこの Car-Parrinello の方法を次の二つの問題に適用した。

- (a) 結晶シリコンの価電子の基底状態の計算。
- (b) ダイヤモンド構造の固有振動のシミュレーション。

これらの計算結果から、次のことが明らかになった。

- (a) Car-Parrinello の法から得られた電子構造は、密度汎関数法を用いて計算されたものと一致している。
- (b) 価電子の波動関数の波動関数を Brillouine zone の中の幾つかの対称点を考慮に入れて平面波で展開することにより、正しい動力学が実現される。